

A サイト欠損ペロブスカイト構造の $\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$ の導電特性と平均・局所・電子構造の組成依存

(東理大理工) ○湯 宜中・北村 尚斗・石橋 千晶・井手本 康
 Composition dependencies of conduction properties, average, local, and electronic structures of $\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$ with A-site deficient perovskite structure (Tokyo University of Science)
 ○Yizhong Tang・Naoto Kitamura・Chiaki Ishibashi・Yasushi Idemoto

Because all-solid-state lithium-ion batteries are composed of nonflammable inorganic materials, they have attracted attention as next-generation rechargeable batteries with high safety. In this study, we focused on $\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$ with an A-site-deficient perovskite structure as a solid electrolyte showing lithium ion conduction, and evaluated the conduction properties. We also investigated the average and electronic structures of the samples with $x \leq 0.2$ by synchrotron X-ray diffraction and XAFS measurement, respectively. In addition, neutron total scattering measurements were performed to analyze the distribution of cation vacancies and the local structure around each atom in $\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$.

Keywords : Solid battery; Ion conductor; A-site-deficient perovskite structure

全固体リチウムイオン電池は不燃性の無機材料で構成されることから、発火リスクを排除することができるので、安全性が高い次世代蓄電池として着目されている。本研究では、リチウムイオン伝導体（固体電解質）として A サイト欠損型ペロブスカイトである $\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$ に注目し^{1,2)}、合成した置換体試料について導電特性を評価するとともに、放射光 X 線回折測定と XAFS 測定により各試料の平均構造と電子構造を検討した。さらに、中性子全散乱測定を行い、 $\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$ におけるカチオン空孔の分布状態や各原子周辺の局所構造を解析した。

$\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$ に対して XRD 測定を行った結果、合成した試料の結晶構造はペロブスカイト構造に帰属された(Fig. 1)。導電率を測定した結果、 x が 0.1 よりも大きくなると導電率が低下する傾向が見られた。導電特性と組成の関係を詳細に調べるため、試料の平均構造を検討した。さらに原子配列の関係を詳細に調べるために、全散乱測定により得られたデータを用いて逆モンテカルロ(RMC)モデリングを行った。

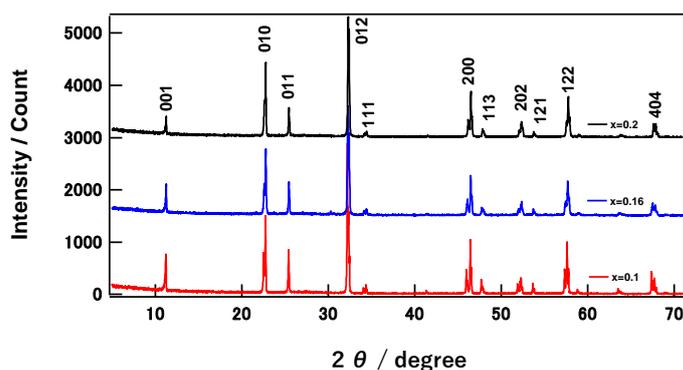


Fig. 1 $\text{Li}_x\text{La}_{(1-x)/3}\text{NbO}_3$ の XRD パターン

- 1) 藤原靖幸ら, 日本結晶成長学会誌, 46, 1, 04 (2019).
- 2) M. S. Ali et al., *Solid State Ionics*, 350, 115330 (2020).